

20/11/00 Implementation d'un pseudo-potentiel avec symétrie de type Martin-Trouiller

- Pour le code, est implementée la lecture de pseudo-HGH

$$\text{qui sont de type: } \sum_{\ell} |l\rangle \langle V_{\ell}^{ion}(n,N) < l| + \sum_{\ell} |l\rangle \langle V_{\ell}^{so}(n,N) \tilde{L} \cdot \tilde{s} < l|$$

après diagonalisation:

cf HGH PRB 58, 3641 (1998)

$$\text{formule (6): } V_{\ell}(g, g') = (-1)^{\ell} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(g) \underbrace{\left( \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 P_i^{\ell}(g) h_{ij}^{\ell} P_j^{\ell}(g') \right)}_{t_{P^{\ell}(g)} H P^{\ell}(g')} Y_{\ell m}^*(g')$$

on diagonalise  $H$

dans la base des vecteurs propres:  $H = t_B \supset B$   $D$ : est diagonal  
 $B$ : diag de base

$$\Rightarrow t_{P^{\ell}(g)} H P^{\ell}(g') = t_{P^{\ell}(g)} t_B D B P^{\ell}(g') = t_{(B P^{\ell}(g))} D (B P^{\ell}(g'))$$

$$\Rightarrow V_{\ell}(g, g') = (-1)^{\ell} \sum_i D_i \sum_m Y_{\ell m}(B P^{\ell})_i(g) \cdot (Y_{\ell m}(B P^{\ell})_i)^*(g') \\ \hookrightarrow \text{problème.}$$

$$= \sum_i E_{k_B}(i) |V_{k_B}^{\ell}(i)\rangle \langle V_{k_B}^{\ell}(i)|$$

- Dans la partie spin-orbite du potentiel on a programmé

$$\sum_i E_{k_B}(i) |V_{SO}^{\ell}(i)\rangle \langle \tilde{L} \cdot \tilde{s} < V_{SO}^{\ell}(i)|$$

- en Martin-Trouiller le potentiel est de la forme:

$$V_{NL} = \sum_{\ell} |V_{\ell}^{ion}\rangle \langle V_{\ell}^{ion}| + \sum_{\ell} |V_{\ell}^{ion}\rangle \langle \tilde{L} \cdot \tilde{s} V_{\ell}^{so}| + \sum_{\ell} |V_{\ell}^{so} \tilde{L} \cdot \tilde{s}\rangle \langle V_{\ell}^{so}| \\ + \sum_{\ell} |V_{\ell}^{so} \tilde{L} \cdot \tilde{s}\rangle \langle V_{\ell}^{so}|$$

$$\text{or } (\tilde{L} \cdot \tilde{s})^2 = \frac{\ell(\ell+1)}{4} I - \frac{1}{2} (\tilde{L} \cdot \tilde{s})$$

$$\Rightarrow V_{NL} = \sum_{\ell} |V_{\ell}^{ion}\rangle \langle V_{\ell}^{ion}| + \sum_{\ell} |V_{\ell}^{so}\rangle \frac{\ell(\ell+1)}{4} \langle V_{\ell}^{so}| \\ + \left[ \sum_{\ell} |V_{\ell}^{ion}\rangle \langle V_{\ell}^{so}| + \sum_{\ell} |V_{\ell}^{so}\rangle \langle V_{\ell}^{ion}| - \frac{1}{2} \sum_{\ell} |V_{\ell}^{so}\rangle \langle V_{\ell}^{so}| \right] \tilde{L} \cdot \tilde{s}$$

on définit le vecteur  $\begin{pmatrix} |V_{\ell}^{ion}\rangle \\ |V_{\ell}^{so}\rangle \end{pmatrix}$

$$\text{en } \alpha: V_{NL} = \sum e^t \sqrt{\nu_0} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{e^{(l+m)}}{4} \end{pmatrix}}_{Q_1} V_0 + (\bar{l}, \bar{s}) \sum e^t \sqrt{\nu_0} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{Q_2} V_0$$

• la matrice  $Q_1$  est diagonale.

→ on peut utiliser une forme KB directement avec deux projections.

→ 1<sup>er</sup> projection:  $E_{KB} = 1 \quad \text{ffopl}(i_1, i_2, l, 1) \rightarrow V_L^{(1)}$

→ 2<sup>nd</sup> projection  $E_{KB} = \frac{e^{(l+m)}}{4} \quad \text{ffopl}(i_1, i_2, l, 2) \rightarrow V_L^{(2)}$

Concrètement dans le code (ppm5.m.f).

on lit:  $V_{L-1/2}, V_{L+1/2}$  pour tout  $l \neq 0$

on calcule:  $\text{ffopl}_{-0}(i_1, i_2, l, 1) = \frac{1}{\sqrt{\int_0^\infty [V_{L-1/2}(n) R_L(n)]^2 dn}} \times \int_0^\infty n^2 V_{L-1/2}(n) R_L(n) f(G_n) dn$   
 (deux ppm5.m.f)

$$\text{et } E_{KB-00} = \frac{\int_0^\infty [V_{L-1/2}(n) R_L(n)]^2 dn}{\int_0^\infty R_L^2(n) V_{L-1/2}(n)^2 dn}$$

la partie  $V_{L+1/2}$  est dans  $\text{ffopl}_{-00}$  et  $E_{KB-00}$

Dans un calcul KB classique on effectue le produit  $E_{KB}^L \times \text{ffopl}(G) \times \text{ffopl}(G')$   
 $= \text{sign}(E_{KB}^L) \sqrt{|E_{KB}^L|} \text{ffopl}(G) \times \sqrt{|E_{KB}^L|} \text{ffopl}(G')$

on calcule donc

$$\text{ffopl}^{(1)}(G) = \frac{1}{2l+1} \left[ (l+1) \sqrt{|E_{KB-00}|} \text{ffopl}_{-00}(G) + l \sqrt{|E_{KB-0R}|} \text{ffopl}_{-0R}(G) \right]$$

$$\text{ffopl}^{(2)}(G) = \frac{2}{2l+1} \left[ \sqrt{|E_{KB-00}|} \text{ffopl}_{-00}(G) - \sqrt{|E_{KB-0R}|} \text{ffopl}_{-0R}(G) \right]$$

On suppose:  $\text{sign}(E_{KB-00}) = \text{sign}(E_{KB-0R})$

on met alors  $\text{ffopl}^{(1)}$  dans  $\text{ffopl}(i_1, i_2, l, 1)$  avec  $E_{KB}^L(1,1) = \text{sign}(E_{KB}^L)$

$\text{ffopl}^{(2)}$  dans  $\text{ffopl}(i_1, i_2, l, 2)$  avec  $E_{KB}^L(2,2) = \text{sign}(E_{KB}^L)$   
 pour l allant de 1 à  $l_{max}+1$   $\times \frac{e^{(l+m)}}{4}$

• la matrice  $Q_2$  n'est pas diagonale. Ses valeurs propres sont  $\lambda_1 = \frac{-1}{2} (1 + \sqrt{17})$   $\lambda_2 = \frac{1}{2} (1 + \sqrt{17})$

ses vecteurs propres sont:  $V_1 \begin{vmatrix} \frac{1}{2} (1 - \sqrt{17}) \\ 1 \end{vmatrix} \quad V_2 \begin{vmatrix} \frac{1}{2} (1 + \sqrt{17}) \\ 1 \end{vmatrix}$

dans une base  $(v_1, v_2)$  le vecteur  $v_0$  a comme coordonnées  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$

avec  $\begin{cases} \frac{1-\sqrt{17}}{4} a + \frac{1+\sqrt{17}}{4} b = v_{10} \\ a + b = v^{00} \end{cases}$

la matrice de passage est donc:  $P = \begin{pmatrix} \frac{1-\sqrt{17}}{4} & \frac{1+\sqrt{17}}{4} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$   
et  $t_P Q_2 P = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{17}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{17}}{2} \end{pmatrix}$

on a:  $\begin{cases} a = \frac{2}{\sqrt{17}} (v_{10} - \frac{1+\sqrt{17}}{4} v^{00}) \\ b = \frac{2}{\sqrt{17}} (v_{10} + \frac{\sqrt{17}-1}{4} v^{00}) \end{cases}$

on met alors dans  $f_{fopl}(i_1, i_2, l, z) = \frac{z}{\sqrt{17}} (f_{fopl}^{i_1} - \frac{1+\sqrt{17}}{4} f_{fopl}^{00})$

$$f_{fopl}(i_1, i_2, l, z) = \frac{z}{\sqrt{17}} (f_{fopl}^{i_1} + \frac{\sqrt{17}-1}{4} f_{fopl}^{00})$$

par l'ellent de  $l_{max+2}$  à  $l_{max+1}$  (ou  $m_{polym+1}$  à  $m_{polym}$ )

avec comme valeur KB entières  $E_{KB}^l(1,1) = \text{sign}(E_{KB}^l) \times -\frac{\sqrt{17}}{2}$

$$E_{KB}^l(2,2) = \text{sign}(E_{KB}^l) \times \frac{\sqrt{17}}{2}$$